

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ И МАГНИТНОЙ СТРУКТУРЫ КОРРЕЛИРОВАННЫХ МЕТАЛЛОВ НА ПРИМЕРЕ ГЕРМАНИДА ЖЕЛЕЗА

Андреев С.Н.*, Мазуренко В.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: kotkescha@mail.ru

Исследование коррелированных металлов привлекает многих ученых, поскольку они демонстрируют множество важных магнитных свойств [1]. Например, спиновую спираль, которая находит применение в устройствах памяти. Как для практического использования, так и для дальнейшего развития теории необходимо проведение первопринципных расчетов, позволяющих получить количественные оценки магнитных явлений. При этом необходимо учитывать дальнodelствующие магнитные взаимодействия.

Одним из таких коррелированных металлов является германид железа. По данным эксперимента на один атом железа приходится магнитный момент $1 \mu_B$. Период спиновой спирали составляет для соединения 700 \AA . В рамках настоящего исследования были проведены LDA расчеты с использованием программного комплекса ELK [2]. Полученные результаты показали, что основной вклад в спектр электронных возбуждений вносят $3d$ электроны. Основные особенности электронной плотности для данного соединения таковы: вблизи уровня Ферми находится энергетическая щель шириной 0.03 эВ , ширина первого пика 0.37 эВ . Это хорошо согласуется с результатами, представленными в работе [3].

Была произведена оценка компонент спиновых и орбитальных моментов для различных направлений внешнего магнитного поля. При проведении LSDA расчетов с учетом спин-орбитального взаимодействия, получены орбитальные и полные магнитные моменты для атомов железа в элементарной ячейке. Абсолютная величина магнитного момента, приходящегося на один атома железа, равна $1 \mu_B$, что согласуется с экспериментальными данными и результатами работ [4,5]. В зависимости от конкретного направления внешнего поля, мы наблюдаем разные неколлинеарные структуры. Зная отклонение на каждом узле, можно определить период спиновой спирали. Для данного соединения период спиновой спирали был оценен как 527 \AA , что находится в разумном согласии с экспериментальным значением.

Поскольку исследования коррелированных металлов являются актуальными, то в рамках подобной расчетной схемы будут исследованы другие соединения, демонстрирующие сложные магнитные свойства, например MnSi и $\text{Cu}_2\text{O}(\text{SeO}_3)$.

1. Manyala N., Sidis Y. et al., Magnetoresistance from quantum interference effects in ferromagnets Nature, **404**, 581-584(2000)

2. www.elk.sourceforge.net
3. Anisimov V. I., Hlubina R. et al., Phys. Rev. Lett., **89**, 257203 (2002)
4. Wappling R. and Haggstorm L., Phys. Lett. **28A**, 173(1968)
5. Lundgren L., Blom K.A., and Beckman O., Phys. Lett. **28A**, 175 (1968)

СТЕКЛОВАНИЕ И КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ КОНДЕНСАТА ПРИ ПОЛУЧЕНИИ ГИДРАТА МЕТОДОМ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОГО ОСАЖДЕНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПУЧКОВ

Анисимов И.С.^{1*}, Виноградов А.В.²

¹)Уральский федеральный университет имени первого Президента России

Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия

²)Институт теплофизики УрО РАН, г. Екатеринбург, Россия

*E-mail: Fiar920@gmail.com

Известные в настоящее время способы получения газовых гидратов связаны с использованием высоких давлений в лабораторном или технологическом оборудовании. Например, давление соответствующее условиям образования гидрата метана при температурах, близких 0 °С, составляет десятки бар, при комнатной температуре – сотни бар. Так же известны разработки проводимые в Институте теплофизики СО РАН, где газовые гидраты образуются в ударных трубах [1]. Между тем, как было показано в исследованиях, проведенных в Институте теплофизики УрО РАН, образование газовых гидратов возможно при больших отклонениях от условий равновесия фаз, при неравновесной низкотемпературной конденсации молекулярных пучков двухкомпонентных водных смесей [2].

Аморфные конденсаты водно-газовой смеси получали в вакуумном криостате осаждением молекулярных пучков на охлаждаемую жидким азотом медную подложку. Условия осаждения двухкомпонентных конденсатов при фиксированных расходах воды и газа позволяли получать образцы постоянного состава и обеспечивали отвод теплоты конденсации. Толщина осажденных образцов составляла 50–100 мкм. Для измерения диэлектрических свойств образцов использовался емкостный датчик, который представлял собой пленочный конденсатор, изготовленный методом фотолитографии.

В результате экспериментов было получено, что температура кристаллизации образца увеличивается от 159 К при нулевом содержании диоксида углерода до 167 К при его содержании 18 масс. %. Заметного влияния изменения концентрации газа в образце на температуру стеклования не обнаружено. Увеличение скорости нагревания приводило к смещению сигналов стеклования и кристаллизации в сторону высоких температур.

При кристаллизации конденсата происходит образование гидрата диоксида углерода. При атмосферном давлении сохранение газового гидрата наблюдали вплоть до ~270 К. Образцы, полученные при максимальном расходе диоксида